

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ

 $\text{Sm}_{0.9}\text{Ca}_{1.1}\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{O}_{4-\delta}$ И $\text{Sm}_{0.9}\text{Ca}_{1.1}\text{Fe}_{0.3}\text{Co}_{0.7}\text{O}_{4-\delta}$

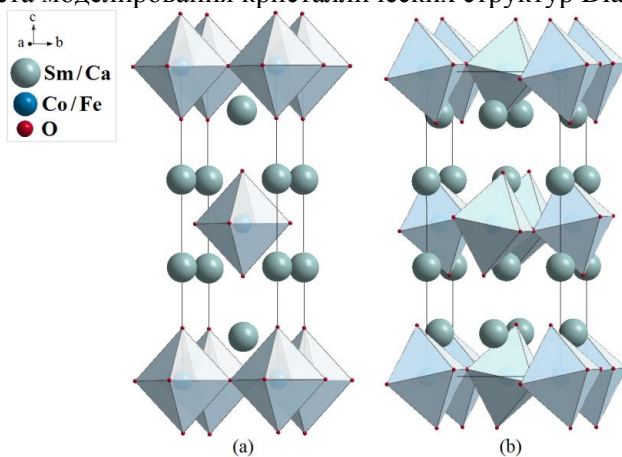
Дягилева А.Д., Галайда А.П., Волкова Н.Е., Гаврилова Л.Я., Черепанов В.А.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Интерес к сложным оксидам с перовскитоподобной структурой как потенциальным материалам катодов топливных элементов обусловлен широкими возможностями целенаправленного получения соединений путём допирования атомами различных элементов. Основное внимание уделяется оксидам на основе редкоземельных элементов и $3d$ -металлов, поэтому целью настоящей работы является изучение структуры и физико-химических свойств сложных оксидов $\text{Sm}_{0.9}\text{Ca}_{1.1}\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_{4-\delta}$ ($x=0.3; 0.7$).

Образцы для исследования были приготовлены по глицерин-нитратной технологии. Отжиг образцов проводился при температуре 1100°C на воздухе с последующим медленным охлаждением до комнатной температуры. Фазовый состав образцов контролировался рентгенографически.

По результатам РФА установлено, что ряд твёрдых растворов $\text{Sm}_{0.9}\text{Ca}_{1.1}\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_{4-\delta}$ образуется непрерывно в границах $0 \leq x \leq 0.7$. Для дальнейшего детального исследования были выбраны образцы с содержанием кобальта $x=0.3$ и $x=0.7$, поскольку данные составы обладают различными типами кристаллических структур. Рентгенограммы образцов при $0.0 \leq x \leq 0.6$ описываются в рамках орторомбической ячейки (пр. гр. $Bmab$), в то время как сложный оксид $\text{Sm}_{0.9}\text{Ca}_{1.1}\text{Fe}_{0.3}\text{Co}_{0.7}\text{O}_{4-\delta}$ кристаллизуется в тетрагональной ячейке пространственной группы $I4/mmm$. На рисунке приведены модели элементарных ячеек оксидов $\text{Sm}_{0.9}\text{Ca}_{1.1}\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{O}_{4-\delta}$ и $\text{Sm}_{0.9}\text{Ca}_{1.1}\text{Fe}_{0.3}\text{Co}_{0.7}\text{O}_{4-\delta}$, построенные с помощью программного пакета моделирования кристаллических структур Diamond.



Модели элементарных ячеек сложных оксидов:

(a) $\text{Sm}_{0.9}\text{Ca}_{1.1}\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{O}_{4-\delta}$, пр.гр. $I4/mmm$, $a=3.746 \text{ \AA}$, $c=11.882 \text{ \AA}$;

(b): $\text{Sm}_{0.9}\text{Ca}_{1.1}\text{Fe}_{0.3}\text{Co}_{0.7}\text{O}_{4-\delta}$, пр.гр. $Bmab$, $a=5.315 \text{ \AA}$, $b=5.354 \text{ \AA}$, $c=11.914 \text{ \AA}$